学校编号：10384　　分类号：__________ 密级：__________
学　号：17020051301624　　UDC: ______________________________

厦　门　大　学

硕　士　学　位　论　文

k- 悬挂边的树的 Wiener 指标研究

The research on the Wiener index of trees with $k-$pendent

洪　荣　辉

指导教师姓名：　张莲珠　教授

专 业 名 称：　应 用 数 学

论文提交日期：　2008 年 4 月

论文答辩日期：　2008 年 6 月

学位授予日期：　2008 年　月

答辩委员会主席：__________

评　阅　人：__________

2008 年 4 月

厦门大学学位论文原创性声明

兹呈交的学位论文，是本人在导师指导下独立完成的研究成果。本人在论文写作中参考的其它个人或集体的研究成果，均在文中以明确方式标明。本人依法享有和承担由此论文而产生的权利和责任。

声明人（签名）：

年　月　日

厦门大学学位论文著作权使用声明

本人完全了解厦门大学有关保留、使用学位论文的规定。厦门大学有权保留并向国家主管部门或其指定机构送交论文的纸质版和电子版，有权将学位论文用于非赢利目的的少量复制并允许论文进入学校图书馆被查阅，有权将学位论文的内容编入有关数据库进行检索，有权将学位论文的标题和摘要汇编出版。保密的学位论文在解密后适用本规定。

本学位论文属于

1、保密（　），在　　　年解密后适用本授权书。

2、不保密（　）。

（请在以上相应括号内打"√"）

作者签名：　　　　　　日期：　　年　月　日

导师签名：　　　　　　日期：　　年　月　日

目 录

Contents

摘　要

一个连通图的 $Wiener$ 指标是图中所有无序顶点对之间的距离之和。这个概念是由化学家 Wiener 于 1947 年首次提出的。$Wiener$ 指标在理论化学和通讯网络中有大量的应用。自二十世纪七十年代以来，$Wiener$ 指标已得到广泛的研究，并得到了许多新的结果。其中，给定 k- 悬挂边的树的 $Wiener$ 指标的极值问题的研究尤其受到关注。近年来，Entringer 得到了下面的结论 [2]：如果 T 是阶数为 n，k- 悬挂边的树，$2 \le k \le n$，那么 $W(S(n,k)) \le W(T) \le W(D(n, \lfloor \frac{k}{2} \rfloor, \lceil \frac{k}{2} \rceil))$。当 $T \cong S(n,k)$ 时取到下界；当 $T \cong D(n, \lfloor \frac{k}{2} \rfloor, \lceil \frac{k}{2} \rceil)$ 时取到上界。

我们很自然地想了解阶数为 n，k- 悬挂边的树的 $Wiener$ 指标的第二大值问题。本文作了这方面的研究。全文分为三章。第一章，我们给出一些基本概念和研究进展。第二章，我们从分析树的变换与 $Wiener$ 指标的关系入手，将寻求具有第二大 $Wiener$ 指标的树的集合缩小到“毛虫”树的范围内讨论。接着，应用分块计算 $Wiener$ 指标的方法得出“毛虫”树的一般解析表达式，分析了移边变换时，树的 $Wiener$ 指标的变化规律，进而确定了第二大 $Wiener$ 指标的数值以及达到第二大 $Wiener$ 指标的树的结构。第三章，我们给出第三大 $Wiener$ 指标的树的若干性质以及一些特殊树类依 $Wiener$ 指标的序关系。

关键词：树，$k-$ 悬挂边，$Wiener$ 指标。

Abstract

The Wiener index of a graph is just the sum of distances between all unordered pairs of vertices of the graph. This concept is put forward by the chemist Wiener in 1947 for the first time. The Wiener index is widely used in the fields of chemistry and communication network and has been extensively studied since the middle of 1970s.Many new results are obtained. It may be especially interesting to determine the tree with extremal Wiener index in all k-pendent trees.Recently Entringer obtained the following result: If T is a tree of order n with k pendent vertices ,$2 \leq k \leq n$,then $W(S(n,k)) \leq W(T) \leq W(D(n, \lfloor \frac{k}{2} \rfloor, \lceil \frac{k}{2} \rceil))$. The lower bound is realized if and only if $T \cong S(n,k)$ and the upper if and only if $T \cong D(n, \lfloor \frac{k}{2} \rfloor, \lceil \frac{k}{2} \rceil)$.

We are naturally curious to know the tree(s) with the second maximum Wiener index in all k-pendent trees. The paper contains three chapters. In chapter 1, we introduce some notations as well as some known results of Wiener index of trees. In chapter 2, in order to determine the tree(s) with the second maximum Wiener index in all k-pendent trees, first we analyse the relations between the Wiener index and the transformation of trees, and reduce the set of the trees to the set of caterpillar. Then we find the recursion of Wiener index of caterpillar, and analyse the change law of the Wiener index of the trees under edge-moving transformation. Thereby we obtain the tree(s) with k-pendent, which reach(s) the second maximum Wiener index. In chapter 3, we obtain some properties of trees with k-pendent whose Wiener index reach the third maximum and some other ordering relations.

Keywords : tree, k-pendent edge, Wiener index.

第一章 引言

§1.1 分子图与 $Wiener$ 指标

图论已广泛应用于诸多学科领域，如计算机科学、通讯工程、物理学、工业管理、心理学及社会学等，但是重要的应用领域应首推化学学科。在化学中，已有的应用涉及合成化学、聚合化学、量子化学及化学信息的存储和检索等。近年来，最大量的应用集中在定量结构一活性 / 性质相关性 (QSAR/QSPR) 的研究方面。

当今，在生物学、药物学、毒物学和环境科学中一个很重要的发展趋势是将分子生物活性 / 性质的定量预测用于分子设计。据估计，大约从 10000 个化合物中才能够筛选出一个作为有效药物投入临床使用。以往凭经验由母体化合物衍生同源化合物的效率很低，因而促使人们去寻找更优的方法和途径来泡制新药。与此类似，在工业和环境科学中，每年要测试 (毒性、致突变、致癌等) 和处理的化合物多达数十万种，若仅靠实验将耗费极大的人力物力，所以必须有新的方法才能满足客观需要。 QSAR/QSPR 方法为我们提供了一条可行的途径。目前已涌现出了诸多 QSAR/QSPR 方法，其中图论方法有其独特的优点，因为这类方法仅依赖于分子结构，即由结构图就可以直接衍生结构特征。拓扑指数就是从化合物的结构图衍生出来的一种数学不变量。

众所周知，分子是由原子组成的，任何两个原子之间可以形成化学键，也可以不成键。由于分子一直在做无规则的运动，如分子的振动，使得分子中原子的位置会发生变化。还有，周围环境的影响，比如温度，压力的变化等也会引起分子的几何性质发生改变。但是，重要的是，分子的内部运动和所受的外部影响并没有旧键的破坏或新键的形成。换句话说，在这些形变过程中，尽管分子的几何性质会发生改变，分子中原子之间的相互关联的性质并没有改变。分子中原子相互连通的全部信息确定了分子的拓扑性质。分子的拓扑性质是分子在内外因素连续变化过程中始终保持不变的几何性质，它是分子的固有性质之一 [2] 。

正因为分子具有这种固有的拓扑性质，不同的分子结构对应着不同的拓扑性质，不同的拓扑性质对应着分子不同的物理化学特性。因此，人们就想用图来表

示分子的拓扑结构，于是，一门新兴的学科 ——化学图论诞生了。

在化学图论中，我们可以用一个图来描述分子的拓扑结构，即用顶点表示原子，边表示键，该图就称为分子图。分子图表达了分子的拓扑性质，它的结构特征反映了其相应化合物的结构特征。如果两个分子中的原子之间具有相同的连通性质，或者说，它们具有相同的分子图，那么就可以说两个分子的拓扑性质是相同的。我们把在分子图中不依赖于顶点的标号方式的量叫做分子图的不变量。例如图的顶点数，边数等都可以作为其不变量。分子图的各种不变量不但可以定量的描述分子的结构，而且可以分析相关分子图的结构与性能之间的关系。通常把具有这种作用的分子图的不变量叫做分子图的拓扑指标。

化学界经常会遇到计算某分子图的拓扑指标值，从而统计的估计相对应的分子的某种物理或化学性质。同时也会遇到其逆问题，即想合成具有某种活性的化合物。我们可以借助图论这个有用的工具，得到相应的分子图，使得分子图的拓扑指标值为某个具体值或者在某个域内，这就是求给定分子图的拓扑指标值的逆问题。

现在, 这种逆问题的研究越来越多, 如组合化学的一个中心问题就是寻找具有某种物理或化学性质的分子。为了得到所期望的分子，首先要得到这种分子的拓扑指标，然后利用计算机搜索，建立具有这种指标值的分子图的数据库，最后在库中选择最理想并且能够合成的结构去合成它们。因此，该问题的深入研究对有目的合成一些分子或药物有指导作用，具有重要的理论价值和应用前景。

$Wiener$ 指标 (有时也称为 $Wiener$ 数) 是目前化学界公认的第一个分子拓扑指标, 它由美国化学家 Wiener[13] 于 1947 年首次提出, 用来估计化合物链烷的沸点。在 [13] 中 Wiener 得到了一个依赖于链烷分子图（即一棵树）的值，这就是后来的 $Wiener$ 指标，并且给出了 W 与链烷沸点 (bp) 之间的一个关系式：

$$bp \approx \alpha W + \beta P + \gamma$$

这里 α, β 与 γ 为经验常数， p 为分子图中距离为 3 的顶点对的个数。

此后，$Wiener$ 指标就成为化学图论中一个很重要的术语，成为用图的理论建立分子模型时最频繁使用的概念之一。与之密切相关的另一个概念 ——平均距离，

表示图中所有无序顶点对之间距离的平均值。这一概念被用于计算机系统连通方面及通讯网络的分析和设计中。总之，这两个概念作为图的重要参数已得到了广大图论工作者的重视和广泛研究。

§1.2 基本概念与术语

我们在本小节中给出本论文将会用到的术语以及一些重要概念。

一个图是指一个有序三元组 $(V(G), E(G), \psi_G)$ ，其中 $V(G)$ 是非空的顶点集，$E(G)$ 是不与 $V(G)$ 相交的边集，而 ψ_G 是关联函数，它使 G 的每条边对应于 G 的无序顶点对。若 e 是一条边，而 u 和 v 是使得 $\psi_G(e) = uv$ 的顶点，则称边 e 连接顶点 u 和 v ，顶点 u 和 v 称为边 e 的端点。

一条边的端点称为与这条边关联，反之亦然。与同一条边关联的两个顶点称为相邻的；与同一个顶点关联的两条边也称为相邻的。端点重合为一点的边称为环，端点不相同的边就称为连杆。

一个图称为有限的,如果它的顶点集和边集都有限。只有一个顶点的图称为平凡图，其它所有的图都称为非平凡图。

一个图称为简单图，如果它既没有环也没有两条连杆连接同一对顶点。

对于图 G 的两个顶点 u 和 v ，如果在 G 中存在一条从 u 到 v 的通路，则称 u 和 v 是连通的。如果图 G 任意两个顶点都是连通的，则称 G 为连通图。一条通路 $v_1v_2\cdots v_n$ 的长度为 n 。 n 也就是这条通路中边的数目。

设图 G 中顶点 u 和 v 是连通的，则从 u 到 v 的最短通路的长度就称为 u 到 v 的距离，记为 $d_G(u,v)$(或简记为 $d(u,v)$) 。对连通图 G 的两个不相交的顶点集合 A, B ，我们定义 $W(A,B) = \sum\limits_{a\in A, b\in B} d_G(a,b)$ 。特别地，当 A 中只有一个元素 a 时，我们记 $W(a,B)$ 替代 $W(\{a\},B)$ ，当 B 中只有一个元素时同样处理。

设 $v \in V(G)$ ，则 $G-v$ 表示从 G 中删去 v 及与这个顶点相关联的全部边所得到的子图。设 $e \in E(G)$ ，则 $G-e$ 表示从 G 中删去边 e 所得到的图。

设图 G 为顶点数为 n 的连通图,对于任一 $v \in V(G)$,我们称 $ec(v) = max\{d_G(v,x)| x \in V(G)\}$ 为顶点 v 的离心率。由此我们定义一个连通图 G 的半径 $r(G) = min\{ec(v)| v \in V(G)\}$ ，直径 $D(G) = max\{ec(v)|v \in V(G)\}$ 。

对于 $v \in V(T)$ ，则 T 在 v 的分枝指的是 T 中包含 v 并以其为悬挂点的极大子树；而分枝 B 的重量 $BW_T(B)$ 指的是 B 中的边数；点 v 的分枝重量 $BW_T(v)$ 指的是在 v 的各个分支中最大的重量。而一棵树 T 的质心 (centroid) 则是 T 中具有最小分枝权重的点的集合，我们用 $C(T)$ 来表示。

给出图 G 中的点 v ，与其相邻的点集记为 $N_G(v)$ ，顶点的度 $d_G(v)$ 是指 G 中与 v 关联的边的数目。即顶点的度 $d_G(v) = |N_G(v)|$ 。度等于 1 的顶点称为悬挂点。

树是无圈连通图，树 T 的顶点集和边集分别记作 $V(T)$ 和 $E(T)$ ；树 T 的顶点数用 $n(T)$ 表示，称为 T 的阶，即 $|V(T)| = n(T)$ 。树有以下固有的性质： $|E(T)| = n(T) - 1$ 。阶为 n 的树中，至少有两个悬挂点，至多有 $n-1$ 个悬挂点。悬挂点为 2 的树称为路，记为 P_n ；悬挂点为 $n-1$ 的树称为星图，记为 S_n 。树 T 中，度大于 3 的顶点称为分枝点。路 P_n 是唯一的没有分枝点的树。

我们构造图 E_x 如下：

设一条路 $P_{n-1} = v_1 v_2 \cdots v_{n-1}$ ，v 为一孤立顶点，我们连接顶点 v 和顶点 $v_x(2 \le x \le n-2)$ ，由此形成的图，我们称为 E_{x-1} 。

对任意一个实数 x ，$\lceil x \rceil$ 是指不小于 x 的最小整数，而 $\lfloor x \rfloor$ 是指不大于 x 的最大整数。其他未加予说明的术语和符号均引自文献 [5] 。

§1.3 树的 $Wiener$ 指标的极图研究进展及本文主要结果

自从 1947 年 $Wiener$ 指标问世之后，它就成为科学家们手中的重要工具。六十年来，科学家们利用该指标在统计化学、结构化学、有机化学以及药物等方面的研究活动一直没有停止过。经过长期的研究，科学家们发现很多化合物的物理和化学性质与它们的拓扑性质密切相关。 $Wiener$ 指标就是一个与化合物的物理化学性质密切相关的拓扑指数，所以对这一指标的研究也日趋重视化。数学家对下面两个问题很感兴趣：

(1) 图的 $Wiener$ 指标与图的结构究竟是怎样的依赖关系。

(2) 如何有效的计算图的 $Wiener$ 指标，尤其是不利用计算机的情况下（即所谓的"纸笔方法"）。

$Wiener$ 指标被广泛应用到描述分子结构，其中确定具有最大和最小 $Wiener$ 指标的树的研究尤其受到关注。对于给定一些参数的树的 $Wiener$ 指标极值问题的研究是一个热点问题 [20,22,23,24,25]，在某些给定的图类中找出具有极端 $Wiener$ 指标的图的结构问题，在化学上和数学上都有很大的意义，并且在这方面已经有许多结果 [2,3,6]。

Entringer,Jackson 和 Snyder 在 [7] 中首次提到关于路 P_n 和星图 S_n 的 $Wiener$ 指标的解析表达式： $W(P_n)=C_{n+3}^3$， $W(S_n)=(n-1)^2$ 。并且在同一篇文章中也证明了在所有阶为 n 的树中， $Wiener$ 指标最大的是路 P_n ，最小的是星图 S_n 。

定理 1.3.1[10] (a) 如果 T 是一棵阶为 n 的树，那么，对于所有的整数 $n(n\geq 1)$,

$$W(S_n)\leq W(T)\leq W(P_n)$$

(b) 如果 $T\in T_n\backslash\{S_n,P_n\}$ ， 那么，对于所有的整数 $n(n\geq 5)$,

$$W(S_n)<W(T)<W(P_n)$$

但是上述结果是比较平凡的，没有考虑到其他的一些相应条件，并且这个应用的范围也比较窄，化学家与数学家们对这样的结果并不满意，于是进一步的研究是很重要的。 Fischermann,Hoffmann,Rautenbach,Szekely 和 Volkmann 等人在 [8] 中给

出了另外一个比较重要的结果：在给定树 T 阶数 n 和最大度 Δ 的条件下，$Wiener$ 指标最大和最小的树的形状。而 Triesch 在 [9] 中对上述问题中最小的 $Wiener$ 指标的树的结构给出了另外一个独立的证明。陈德勤在 [18] 中对 (M-N)- 图类 $Wiener$ 指标的极小值问题进行了研究，给出这一类图的一般构造办法。郭晓峰，董哈微在文章 [6] 中定义了缩边增长变换以及移边变换，从而给出了树的 $Wiener$ 指标的一个最小排序，得到了 $Wiener$ 指标最小的 15 棵树 [6] 。

记顶点数为 n 的树的集合为 T_n 。

定义 1.3.2 [6] 设 $T \in T_n$ ， $n \geq 3$ ， $e = uv$ 是树 T 的非悬挂边， $T - e$ 的两分枝分别记为 T_1 ， T_2 。 $u \in T_1$ ， $v \in T_2$ 。 T_0 是通过以下方式由 T 得到的图：

(1) 收缩边 $e = uv$ 。

(2) 在 $u (= v)$ 上增加一条悬挂边。

过程 (1) 和 (2) 称为树 T 关于边 e 的缩边增长变换。若 T 通过一步缩边增长变换变为 T_0 ，这个变换记为 $T \to T_0$（如图 1.3.1 所示）。

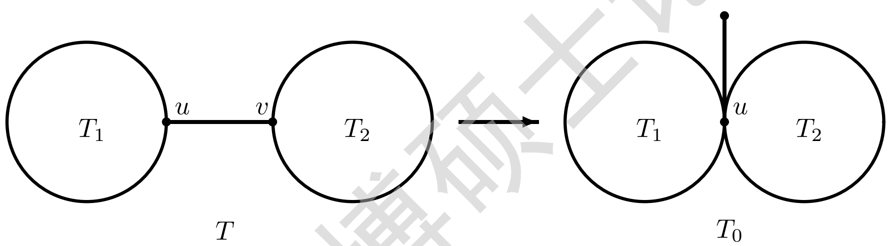


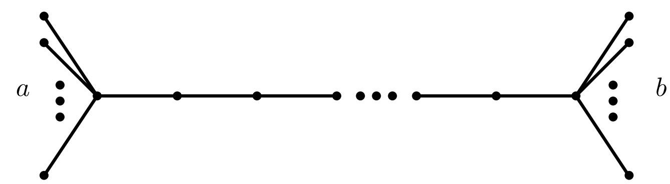
图 1.3.1

定理 1.3.3 [6] 设 $T \in T_n$ ， $n \geq 3$ ，且设 T 至少有一条非悬挂边。如果树 T 通过一步的缩边增长变换变为树 T_0 ，那么 $W(T_0) < W(T)$ 。

缩边增长变换使树 T 的 $Wiener$ 指标变小，且悬挂边数增加 1 ，非悬挂边数减少了 1 。它破坏了 k- 悬挂边的条件。

在一条路 P_{n-a-b} 上，把 a 个独立的顶点邻接到其中一个端点上，把 b 个独立的顶点邻接到这条路的另一个端点，这样得到的图我们记为 $D(n, a, b)$（如图 1.3.2 所示）；而图 $S(n, k)$ 指的是这样的树：它恰好有一个中心 v ，不妨设 v 有 $m (3 \leq m \leq n - 1)$ 个分枝， v 的每一个分枝是长为 $\lfloor \frac{n-1}{m} \rfloor$ 或 $\lceil \frac{n-1}{m} \rceil$ 的路。在 1999 年 Entringer

得到了下面的结论 [2]:



$D(n,a,b)$

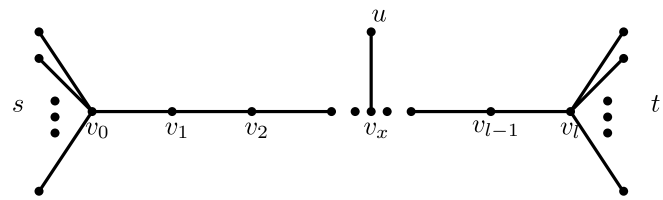
图 1.3.2

定理 1.3.4[1,2,3] 如果 T 是阶数为 n ，k- 悬挂边的树，$2 \le k \le n$ ，那么 $W(S(n,k)) \le W(T) \le W(D(n,\lfloor\frac{k}{2}\rfloor,\lceil\frac{k}{2}\rceil))$ 。当 $T \cong S(n,k)$ 时取到下界；当 $T \cong D(n,\lfloor\frac{k}{2}\rfloor,\lceil\frac{k}{2}\rceil)$ 时取到上界。

本文研究的是 k- 悬挂边的树的 $Wiener$ 指标的极图，树的变换必须保持 k- 悬挂边不变这一条件。本文采用标准的图论语言对顶点数为 n ，悬挂边为 k 的树的 $Wiener$ 指标的极值问题进一步研究。在第二章，我们从分析树的变换（保持 k- 悬挂边不变）与 $Wiener$ 指标的关系入手，将寻求具有第二大 $Wiener$ 指标的树的集合缩小到“毛虫”树的范围内讨论。接着，应用分块计算 $Wiener$ 指标的方法得出“毛虫”树的一般解析表达式，分析了移边变换时，树的 $Wiener$ 指标的变化规律，从而给出了树的 $Wiener$ 指标的第二大值以及达到第二大 $Wiener$ 指标的树的结构。在第三章，我们给出第三大 $Wiener$ 指标的树的若干性质以及一些特殊树类依 $Wiener$ 指标的序关系。

我们定义图 $D^*(n,s,t,x)$ 如下：

在一条路 $P_{n-s-t-1}$ 上，记路的长 $l = n-1-s-t-1$ ，将路的顶点从左向右重新标号为 $v_0, v_1, \cdots, v_l$ 。把 s 个独立的顶点邻接到这条路的左端点 v_0 上，把 t 个独立的顶点邻接到这条路的右端点 v_l ，剩下的一个独立的顶点邻接到路中的某一个顶点 v_x（ $x \in (0,l)$ ）上，这样得到的图我们记为 $D^*(n,s,t,x)$（如图 1.3.3 所示）。



$D^*(n,s,t,x)$

图 1.3.3

本文的主要结果是:

定理 1.3.5 设 T 是阶数为 n ， k- 悬挂边的树，若 $k \equiv 1 \bmod(2)$ ，则 $W(T)$ 取到第二大值 $W(T) = (k-1)^2 + C_{l+2}^3 + \frac{l(l+1)}{2} + \frac{(k-1)^2}{4}l + (k-1)\frac{l^2+6l+6}{2} + 2$ 当且仅当 $T \cong D^*(n, \frac{k-1}{2}, \frac{k-1}{2}, 1)$；若 $k \equiv 0 \bmod(2)$，则 $W(T)$ 取到第二大值 $W(T) = k^2 + (\frac{k^2}{4} - 1)l + C_{l+2}^3 + k\frac{l^2+5l+2}{2}$ 当且仅当 $T \cong D(n, \frac{k}{2}+1, \frac{k}{2}-1)$ 或 $T \cong D^*(n, \frac{k}{2}, \frac{k}{2}-1, l-1)$ 。

第二章 具有第二大 $Wiener$ 指标的 k- 悬挂边的树

§2.1 预备知识

在这一节里, 我们首先介绍与本文有关的定义和结论, 为后面的讨论作准备。

定义 2.1.1 G 是一个连通图，其中 $V(G)$ 是图 G 的非空顶点集， $E(G)$ 是图 G 的边集，则我们定义图 G 的 $Wiener$ 指标为 $W(G)=\sum\limits_{u,v\in V(G)} d_G(u,v)$ 。

其中 $d_G(u,v)$ 表示连通图 G 中两个顶点 u 和 v 之间的距离，和式取遍 G 中所有的顶点对。

定义 2.1.2 G 是一个连通图， d 为图的直径， x_i 表示距离为 i 的顶点对个数，则图 G 的 $Wiener$ 指标可表示为 $W(G)=\sum\limits_{i=1}^{d} ix_i$ 。

设 T 是一棵阶为 n 的树， e 的两端点为 x 和 y ，

$$\begin{aligned} n_1(e) &= |\{v|v\in V(T), d_T(v,x)<d_T(v,y)\}| \\ n_2(e) &= |\{v|v\in V(T), d_T(v,y)<d_T(v,x)\}| \end{aligned}$$

1947 年， Wiener 得到了计算顶点个数为 n 的树的 $Wiener$ 指标的另一个较直观简便的计算公式:

定理 2.1.3[6] 设 T 是一棵树， $e\in E(T)$ ， $n_1(e)$ 和 $n_2(e)=n-n_1(e)$ 分别是 $T-e$ 的两分枝的顶点数，那么 $W(T)=\sum\limits_{e\in E(T)} n_1(e)n_2(e)$ 。

从 $Wiener$ 指标的定义我们可以看出: 对于一般图, 即使是树来讲, 给出 $Wiener$ 指标的解析表达式是比较困难的。目前人们只给出了少数几个图类的解析表达式, 最著名的有路图 P_n 和星图 S_n 。 $W(P_n)=C_{n+3}^3$ ， $W(S_n)=(n-1)^2$ 。

本文的研究对象是树 T(tree) ，树中任何一对顶点仅由唯一的路 (Path) 所连, 从而可以简化所研究的问题。给定顶点数为 n, 悬挂边为 k 的树，记非悬挂边数等于 l ，则 $l=n(T)-1-k$ 。排除路图和星图后， l 的取值范围为： $l\in[1,n-4]$ 。阶为 n 的树中，至少有两个悬挂点，至多有 $n-1$ 个悬挂点。因此， k 的取值范围为： $k\in[2,n-1]$ 。当 $k=2$ 时，即悬挂点为 2 的树，称为路，即为 P_n ，在同构意